

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES  
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum  
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum  
23. Juni 2005 (23.06.2005)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer  
**WO 2005/056566 A2**

(51) Internationale Patentklassifikation<sup>7</sup>: C07F 9/48, 17/02

(74) Anwalt: MAUÉ, Paul Georg; Solvias AG, Patents, WKL-  
402.3.04, Klybeckstrasse 191, CH-4002 Basel (CH).

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2004/053388

(22) Internationales Anmeldedatum:  
10. Dezember 2004 (10.12.2004)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:  
02134/03 12. Dezember 2003 (12.12.2003) CH

(71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme  
von US): SOLVIAS AG [CH/CH]; Klybeckstrasse 191,  
CH-4057 Basel (CH).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (nur für US): PFALTZ, Andreas  
[CH/CH]; Im Klosteracker 11, CH-4102 Binningen (CH).  
LOTZ, Matthias [DE/CH]; Steinbühlallee 117, CH-4054  
Basel (CH). SCHÖNLEBER, Marc [DE/CH]; Dels-  
bergerallee 45, CH-4053 Basel (CH). PUGIN, Benoît  
[CH/CH]; Wasserhausweg 16, CH-4142 Münchenstein  
(CH). KESSELGRUBER, Martin [AT/CH]; Kugeliloos-  
strasse 44, CH-8050 Zürich (CH). THOMMEN, Marc  
[CH/CH]; Oberdorfstrasse 77, CH-4412 Nuglar (CH).

(81) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für  
jede verfügbare nationale Schutzrechtsart): AE, AG, AL,  
AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,  
CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES,  
FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE,  
KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD,  
MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG,  
PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM,  
TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM,  
ZW.

(84) Bestimmungsstaaten (soweit nicht anders angegeben, für  
jede verfügbare regionale Schutzrechtsart): ARIPO (BW,  
GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG,  
ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU,  
TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK,  
EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, MC, NL,  
PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI,  
CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

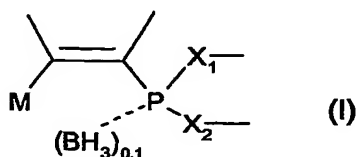
Veröffentlicht:

— ohne internationalen Recherchenbericht und erneut zu ver-  
öffentlichen nach Erhalt des Berichts

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) Title: METHOD FOR PRODUCING ORTHOMETALATED AND ORTHOSUBSTITUTED AROMATIC COMPOUNDS

(54) Bezeichnung: VERFAHREN ZUR HERSTELLUNG VON ORTHOMETALLIERTEN UND ORTHOSUBSTITUIERTEN  
AROMATISCHEN VERBINDUNGEN



(57) Abstract: The invention relates to compounds having a structural element of  
formula (I) in an aromatic hydrocarbon ring, wherein: M represents -Li-, -MgX<sub>3</sub>,  
(C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-Alkyl)<sub>3</sub>Sn-, -ZnX<sub>3</sub> or -B(O-C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-Alkyl)<sub>2</sub>; X<sub>1</sub> and X<sub>2</sub>, independent of one  
another, represent O or N, and C-bound hydrocarbon radicals or heterohydrocarbon  
radicals are bound to the free bonds of the O and N atoms; group -C=C-, together  
with C atoms, forms a hydrocarbon aromatic compound and represents X<sub>3</sub> Cl, Br or  
I. The inventive compounds are easily obtained by directly substituting the hydrogen

in the ortho position to the P atom with metalation reagents. The metal atoms can then be substituted by a reactive electrophilic com-  
pound. The group -P(X<sub>1</sub>)(X<sub>2</sub>)-(BH<sub>3</sub>)<sub>0,1</sub> can then be converted into a secondary phosphine group. The inventive method enables  
the production of monophosphines and diphosphines even on a large scale, which are valuable ligands for metal complexes serving  
as catalysts for, e.g. enantioselective hydrogenations.

(57) Zusammenfassung: Verbindungen mit einem Strukturelement der Formel (I) in einem aromatischen Kohlenwasserstoffring,  
worin M für -Li-, -MgX<sub>3</sub>, (C<sub>1</sub>-C<sub>18</sub>-Alkyl)<sub>3</sub>Sn-, -ZnX<sub>3</sub> oder -B(O-C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>-Alkyl)<sub>2</sub> steht, X<sub>1</sub> und X<sub>2</sub> unabhängig voneinander O oder N-  
bedeuten, und an die freien Bindungen der O- und N-Atome C-gebundene Kohlenwasserstoff- oder Heterokohlenwasserstoffreste  
gebunden sind, die Gruppe -C=C- zusammen mit C- Atomen einen Kohlenwasserstoffaromaten bildet, und X<sub>3</sub> Cl, Br oder I darstellt,  
werden in einfacher Weise durch direkte Substitution des Wasserstoffs in Orthostellung zum P-Atom mit Metallierungsreagenzien  
erhalten. Die Metallatome können dann durch reaktive elektrophile Verbindung substituiert werden. Die Gruppe -P(X<sub>1</sub>)(X<sub>2</sub>)-(BH<sub>3</sub>)<sub>0,1</sub>  
(BH<sub>3</sub>)<sub>0,1</sub> kann dann in eine Sekundärphosphingruppe umgewandelt werden. Mit dem Verfahren können auch im grösseren Massstab  
Mono- und Diphosphine hergestellt werden, die wertvolle Liganden für Metallkomplexe als Katalysatoren für zum Beispiel enanti-  
oselektive Hydrierungen sind.

WO 2005/056566 A2



---

*Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.*